s － d 相互作用

電試　近　藤　　淳

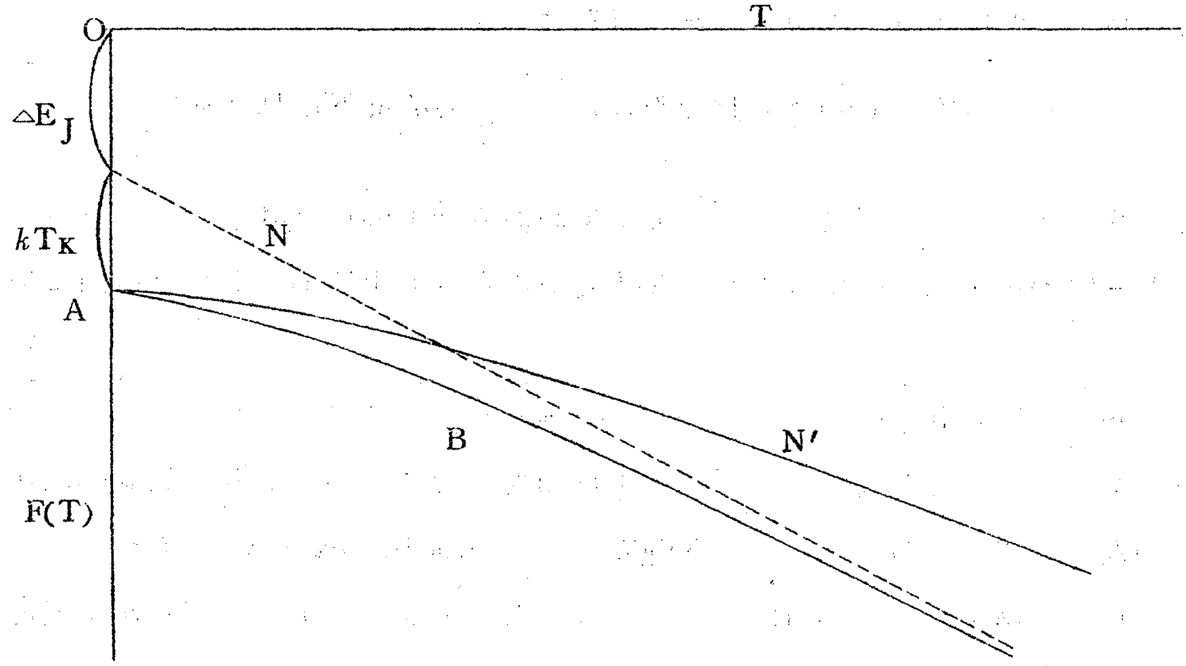
（１１月６日受理）

最近ｓ－ｄ相互作用の問題もようやく収束する方向へ向いつつある。Ｊ＜０のときのComplex pole に關して二つの考え方があった。一つは，高温で摂動展開に一致する解を，うまく低温に解析接続して complex pole が生じないような結果をえられればそれでよいのだというものである。もう一つの考え方はそのようなやり方は問題の一面のみをみるものであってそれでは見落している別の面（いわゆる bound state）があるというもの。前者は Suhl によるもので後者は芳田グループで代表されるものである。我々は原理的に前可の考え方でよいのだということを１０月のシンポジウムでのべ，それを支持する色々の論拠をあげた。前者の考え方をくわしく定義すれば次のようにいってよかろう。まず高温でＪが正のとき成立つ解を求める。Ｊが正の時には bound state の問題はおこらないと一般に信ぜられているから，この解は展開したら摂動展開に一致するものと考えられる。（いわゆる normal state の解）その解のＪの符号を変えたものはＪ＜０のときの解になっているが，それがＪ＜０の正しい解であり，それを低温に滑かにつなげば ground state に到達するというものである。勿論Ｊ＞０のときも高温の解を低温に滑かにつなげればよく，Ｊが正のときと負のときで本質的な差はない。（勿論Ｔ＝０に近づけたときの種々の物理量の値は非常に違うであろうが，それに到達する principle は両方の場合同じである。）これに対し芳田グループの考え方はＪ＜０の場合はＪ＞０の場合と本質的に異るというものである。

前者の考え方は簡単明瞭でありその限りにおいて問題はない。しかしそれには大きな困難が附随していた。芳田・三輪氏[1)]によるとｓ－ｄ相互作用によるフリーエネルギーのシフトを高温展開で求めると実際上温度によらない

結果がえられる。即ちnormal state のフリーエネルギーは$F(T)=\triangle E_J-K_B T\ell og\ 2$ （S＝1/2の場合）となる。但し$\triangle E_J$はJのベキで表わされる項でTによらない。これはJの正負によらず成立つ。この高温展開を低温になめらかにつなげば図のNがえられる。従ってnormal state の ground state energy は$\triangle E_J$ということになる。しかしT＝OではJ＜Oのとき$\triangle E_J$よりもKT_Kの程度低い解（図の点A，いわゆる bound state）があることが解っているからnormal state ではこれに到達することは出来ないということになる。従ってJ＜Oのときnormal state とは essential に違った bound stateというものを考えねばならぬということになる。

次に温度をあげていったときこの bound stateがどのようになるかを考え



てみよう。今Aから出発したとして，十分温度の高い所では bound state の線はnormal state の線に近づかねばならないと考えられる。しかしある温度で直線Nに完全にのり移るとすると，そこで不連続が生じなければならない。そのようなことが起らないためにはAから出発した bound stateの線Bが直線Nに漸近的に近づくと考えねばならぬ。[2)]しかしこのことは温度が極

めて高くなっても（例えば電子系がボルツマン分布になる程高くなっても）bound state が消えずに残るということを意味するわけでこのことは非常に考えにくい。

これに対して我々は次のような提案を行った。即ち bound state というものが特別に存在するのではなく normal stata のフリーエネルギーがNではなくて図のN′のようになっている。従って normal state の解を低温へつなげばそれで正しい ground state Aに到達出来る。従ってこれは最初にのべた二つの考え方のうち前者を正しいとするものである。この提案は次の事実に基いている。

1. 後にのべるように unperturbed state（スピンについて縮退した状態）を出発点としてAというエネルギーがえられる。[3]

2. 高温展開によって芳田・三輪の値のほかに

$$-(8/3)\pi^2 S(S+1) J^3 \rho^3 KT\left[1+6J\rho\ell og(KT/D)+\cdots\right]$$

という項があることが判った。[4] 従って高温で normal state のフリーエネルギーは芳田・三輪の値Nよりも（J＜0のとき）上にありかつ上に凸である。

3. normal state の立場に立つ Suhl 理論を用いてフリーエネルギーを計算してみる。すると高温でたしかに上の項を含むことがわかり，低温へ滑かにつながってT＝0でたしかに KT_K の程度の binding energy をもつ。[5]

これらの結果から normal state の（正しい）フリーエネルギーが全温度領域で図のN′のように振舞うと考えることは極めて自然であろう。またT＝0におけるエントロピー（$-dF/dT$）は，等方的な s－d 相互作用でS＝1/2の場合0になるのではないかと期待される。Suhl 理論ではこれが $K_B(\ell og2-\ell og(27/16))$ となる。勿論 Suhl 理論は近似を含んでおり，それを改良してゆけば正しい答に近づくだろうと予想される。

次にT＝0，H　0の場合を考える。bound state に基く計算は石井・芳

田氏によってなされている。彼等の波動函数は

$$\phi_B = \phi_1 + \phi_3 + \phi_5 + \cdots$$

と表わされる。こゝで ϕ_1 はフエルミ面の外に一コ電子があってスピンと結合している状態，ϕ_3 はそれに更に electronhole pair を一つ作った状態，ϕ_5 は二つ作った状態，… である。ϕ_B を用いて石井氏がえたエネルギー E_B (H)をHに対して描くと丁度前の図の曲線Bのようになる。[6] 但し横軸をHとし，直線Nは$\triangle E_J - \mu H$を表わすとする。

一方同じ場合に，normal state に基く計算が筆者によってなされている。[3] 我々の波動函数は

$$\phi_N = \phi_0 + \phi_2 + \phi_4 + \cdots$$

とする。こゝに ϕ_0 unperturbed state（フエルミ球と $S_z = S$ のスピンstate）ϕ_2 はそれに electron − hole pair が一つ出来た状態（スピンの向きが変ってもよい），… である。この波動函数を用いて磁場が0のときには点Aがえられる。また磁場の十分大きい所では前の図のN′のようになる。つまり直線Nの値 ($\triangle E_J - \mu H$) のほかに

$$-\mu H J\rho \left[1 + 2J\rho \log (2\mu H/D) + \cdots\right.$$

という項があり，そのためJ＜0のときN′はNより上にきて上に凸となる。磁場の場合にはSuhl のような計算はないが，A点と高磁場側をなめらかに結べば全域で曲線N′のようになるものと考えられる。

このように我々は温度の場合にも磁場の場合にも，フリーエネルギー又はエネルギーが図のN′のように振舞いまたそれが唯一の正しい解であると主張する。この考え方には反対も多い。それは，N′がAより出発して直線Nを切りその上に出ることが物理的におかしい，Bのように下にあるべきだという議論である。[2] これに対する我々の考え方は，現在我々が信用出来るの

は高温度又は高磁場側でスピンのダイナミカルな性質が押えられた領域における摂動展開のみである。それがN′のようにNより上に出たのならともかくそれは認めねばならないというものである。

それではなぜ石井氏はBのような結果をえたのだろうか。我々は石井氏の計算をやり直して，ϕ_B を用いても少くとも高磁場においては ϕ_N と同じエネルギー（図のN′）がえられることを見出した。次にこれについてのべる。芳田氏のいわゆる第一近似 $\phi_B=\phi_1+\phi_3$ にとどめ

$$\phi_1=\Sigma_{k\geq k_F}\ (C_k\,a^*_{k-}\,\alpha+d_k\,a^*_{k+}\,\beta)\ \phi_{F\cdot S}$$

ととる。こゝに C_k，dk は変分パラメータ。全エネルギーを次のようにおく

$$E=E_N\ (H)\ -\ a$$

こゝに E_N (H) は磁場のあるときの ϕ_N によるエネルギー（即ち図のN′）a は binding energy でこれから定めようとするもの。あとは両氏の計算と全く同じにしてa に対して次の式をうる。

$$\begin{aligned}
&8C+(4C-8D)\ J\,\Sigma_1\,(\varepsilon_1+a)^{-1}\\
&+(2D-C)\ J^3\,\Sigma_{123}\ [(\varepsilon_1+a)\ (\varepsilon_2+a)\ (\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3+a)]^{-1}\\
&+(4C-2D)\ J^3\,\Sigma_{123}\Big\{[(\varepsilon_1+a)\ (\varepsilon_2+2\mu H+a)\ (\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3+a)]^{-1}\\
&\qquad+[(\varepsilon_1+a)\ (\varepsilon_2+2\mu H+a)\ (\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3+2\mu H+a)]^{-1}\Big\}=0
\end{aligned}$$

このほか第二の式としてCとDをいれかえて分母の数ケ所に 2μHをつけ加えた式がえられる。こゝで $C=\Sigma c_k$, $D=\Sigma d_k$

まず 2μHが十分大きい極限では 2μHを分母に含む項を省略すると第二の式からD＝Oとなり，上の式は

$$\begin{aligned}
&8+4J\,\Sigma_1\ (\varepsilon_1+a)^{-1}\\
&-J^3\,\Sigma_{123}\ [(\varepsilon_1+a)\ (\varepsilon_2+a)\ (\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3+a)]^{-1}=0
\end{aligned}$$

となる。これは static potential の場合に bound state を求める方程式と同一であることがわかる。これは当然で，$2\mu H$ が十分大きければスピンが磁場に逆に向く状態は押えられるからスピンの向きは不変と思ってよい。従って static な問題に reduce するわけである。static の場合には我々は bound state などは生じないことを知っている。容易に判るように上の static の場合の式は解をもたない。即ち $2\mu H$ が十分大きい所では bound state はきえて $a=0$ となり ϕ_B によるエネルギーは ϕ_N によるエネルギーに等しい。

一方 $H=0$ の場合には芳田理論となり解が存在する。中間の場合は上の積分を行わねばならぬ。すると $2\mu H = D\exp(-2/9|J|\rho)$ までは $a=0$ でそれより H が小さくなると不連続的に解が現われることがわかる。勿論これは近似のせいで ϕ_B の高次の項を考慮すれば a の現われる磁場はだんだん小さくなるものと期待される。

次に $a=0$ の意味を考える。$C_k \propto (\varepsilon_k + a)^{-1}$, $d_k \propto (\varepsilon_k + 2\mu H + a)^{-1}$ であるから $a=0$ のときは $\Sigma|C_k|^2$ は∞となり $\Sigma|d_k|^2$ は有限である。従って波動函数を 1 に normlize して考えれば d_k は 0 としてよい。そして $a=0$ ならば c_k はフエルミ面の所に peak をもつから，実空間ではこの電子はスピンに bound されていない。従って $a=0$ ならば，ϕ_N と ϕ_B とが同じエネルギー E_N をもつけれども，essential なのは ϕ_N であって ϕ_B における extra electron は余計者であることがわかる。

H が小さい所では $a \neq 0$ の解が生じる。しかし我々のやり方は H の大きいときに信頼できるものである。そしてそこで binding energy が 0 という reasonable な結果をえた。すでにみたようにこの結果をうるためにはエネルギーを，磁場のあるときの ϕ_N によるエネルギーと binding energy の和の形にしておくことが大切であった。さて極めて自然な仮定として，磁場を小さくしていったとき不連続的な変化はおこるべきでないと考えられる。そうすれば今の我々のやり方（エネルギーのわけ方）は H が非常に小さい極限まで続けねばならぬ。H の小さい所では高次項を∞次まで（most divergent

以外の項も含めて）とりいれねばならぬだろうが，不連続が生じないということから a＝0 という結果は最後まで成立っているだろう。つまり ϕ_B によるエネルギーが図の N′ にひとしいということはHの全域で成立たねばならぬ。しかしこのことはまた ϕ_B の extra electron が bound されないという結果が H＝0 の極限まで成立つことを意味する。これは筆者がすでにのべた芳田理論に対する批判そのものである。[7] そこでは，H＝0のときにも ϕ_B によるエネルギーは ϕ_N によるエネルギーと等しいから extra electron は bound されないとのべた。したがって H＝0 のときには ϕ_B は singlet state を表わすが，それは bound されていない電子と local spin との間の singlet state であってトリビアルなものであるとのべた。このように H＝0，T＝0 でスピンがどのようになっているかをしるためには ϕ_N を調べることが大切である。我々はすでにスピンが 1 の程度減少していることを見出した。[3] スピンに限らず色々な物理量を求める時にも ϕ_N を用いることが essential である。

結論として s－d 相互作用の問題にはもはや原理的に解決しなければならないことはないといえよう。normal state の立場に立って矛盾のない説明を行うことが出来る。bound state といった立場に立つこともできるであろうが，両方の立場で正しく計算を行ったならば全く同一の結果に達するであろう。従って normal state の立場では見落し，bound state の立場でのみとりいれられるような効果があるとは考えられない。むしろ逆に bound state の立場には trivial なものを含んでおり，essential には normal state でつくされている。また現在実際に有限温度又は有限磁場で reasonable な計算がされているのは normal state の場合のみである。

中村彬氏には有益な討論をして頂いた事を感謝します。

文　献

1) K. Yosids & H. Miwa, Phys. Rev. 144, 375 (1966).

2) 芳田グループの考え方。特に5月の教育大における集り。

3) J. Kondo, phys. Rev. 154, 644 (1967)

4) J. Kondo, Progr. Theor. Phys. 40, No.4 (1968).

5) J. Kondo, Progr. Theor. Phys. 40, No.4 (1968).

6) H. Ishii, Progr. Theor. Phys. 40, 201 (1968).

7) J. Kondo, Phys. Rev. 161, 598 (1967).